§ Espectro Contínuo: Posição, momentum e translações.

Muitos observáveis possuem um contínuo de autovalores. A posição $\vec{r} = (x, y, z)$ e o momentum (linear) $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ são exemplos destes observáveis. Em geral seus autovalores podem assumir qualquer valor

$$-\infty < x, p_x < +\infty$$

A dimensionalidade deste espaço é infinita. Muitas das conclusões tiradas para o caso finito podem ser estendidas, mas em geral o problema requer de alguns cuidados (ver problema 1, lista # 2). Para os operadores correspondentes escrevemos a equação de autovalores como

$$\xi |\xi'\rangle = \xi' |\xi'\rangle ,$$

onde ξ é o operador e ξ' seu autovalor. A delta de Krönecker do caso discreto é substituída pela delta de Dirac, já que ξ' é uma variável contínua:

$$\langle a' | a'' \rangle = \delta_{a'a''} \longrightarrow \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'')$$

Relação de completeza:

$$1 = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| \longrightarrow 1 = \int d\xi' \, |\xi'\rangle\langle \xi'|$$

Desenvolvimento em relação à base:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle$$

Probabilidade normalizada:

$$\sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1 \longrightarrow \int d\xi' |\langle\xi'|\alpha\rangle|^2 = 1$$

Probabilidade	Densidade de probabilidade
$P_{a'} = \|\langle a'\|\alpha\rangle\|^2$	$\rho(\xi') = \|\langle\xi'\|\alpha\rangle\|^2$

Abrir o produto escalar:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \longrightarrow \langle\beta|\alpha\rangle = \int d\xi' \langle\beta|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle$$

Operador diagonal na base:

$$\langle a''|A|a'\rangle = a'\delta_{a'a''} \longrightarrow \langle\xi''|\xi|\xi'\rangle = \xi'\delta(\xi'-\xi'')$$

Normalização da "delta":

$$\sum_{a''} \delta_{a'a''} = 1 \longrightarrow \int d\xi' \, \delta(\xi'-\xi'') = 1$$

§ Medição da posição e autoestados da posição

Consideramos o caso de 1-dim para o operador da posição (coordenada x). Sejam $|x'\rangle$ os autoestados com

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \ ,$$

$\{x'\}$ é o correspondente autovalor. Postulamos que estes estados formam um sistema completo: qualquer ket $|\alpha\rangle$ pode ser expandido na base $\{|x'\rangle\}$

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \quad , \quad -\infty < x' < +\infty$$

Colocamos um detetor em x' que "clica" quando a partícula se encontra em essa posição. Imediatamente após a medição o estado da partícula é representado por $|x'\rangle$:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{medição da posição}} |x'\rangle$$

Na verdade, um detetor realista localiza a partícula em

$$\left(x' - \frac{\Delta}{2}, \ x' + \frac{\Delta}{2}\right),$$

com imprecisão Δ. Assim, no processo de medição, o estado colapsa para:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle\, dx'' \longrightarrow \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |x''\rangle\, dx'' \langle x''|\alpha\rangle$$

e supondo que $\langle x''|\alpha\rangle$ varia lentamente no intervalo da medida, a probabilidade de o detetor clicar é dada por:

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \quad , \quad \text{com } \Delta \equiv dx' .$$

A probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar entre $-\infty < x' < +\infty$ deve ser a unidade:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = 1 ,$$

o que implica na normalização do estado $|\alpha\rangle$:

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle\alpha|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, |\langle x'|\alpha\rangle|^2$$

§ <u>Função de onda:</u> Se escrevemos

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x') ,$$

este número complexo representa uma amplitude de probabilidade de encontrar a partícula em x'.
A probabilidade, como visto acima, de encontrar a

partícula no intervalo $(x' - \frac{1}{2}dx', x' + \frac{1}{2}dx')$ é

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' = \psi_\alpha(x')\psi_\alpha^*(x')\,dx' = |\psi_\alpha(x')|^2 dx,$$

e a normalização do estado $|\alpha\rangle$ implica em

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, |\psi_\alpha(x')|^2,$$

de maneira que a função $\psi_\alpha(x')$ deve ser de <u>módulo quadrado integrável</u>. Na Mecânica Ondulatória, $\psi_\alpha(x')$ é chamada de <u>Função de Onda</u>.

Estes conceitos podem ser estendidos para 3-dim. Em Mecânica Quântica não-relativística, assumimos que os autoestados da posição $|\vec{x}'\rangle$ são um sistema completo. Negligenciando outros graus de liberdade, o ket representando um estado arbitrário pode ser expandido na base $\{|\vec{x}'\rangle\}$:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' \, |\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle,$$

onde $|\vec{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle$ é simultaneamente autoestado dos observáveis da posição (x, y, z)

$$x|\vec{x}'\rangle = x'|\vec{x}'\rangle, \quad y|\vec{x}'\rangle = y'|\vec{x}'\rangle, \quad z|\vec{x}'\rangle = z'|\vec{x}'\rangle$$

Assumindo isto, estamos implicitamente supondo que os três observáveis (x, y, z) são compatíveis e que podem ser medidos simultaneamente. Mudando a notação para

$$x_1 \equiv x, \quad x_2 \equiv y, \quad x_3 \equiv z,$$

devemos ter

$$[x_i, x_j] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3$$

§ Operadores de Translação

Construir o operador infinitesimal:

$$\vec{x}' \longrightarrow \vec{x}' + d\vec{x}'$$

Todas as outras propriedades do estado são mantidas.

$$\mathcal{T}(d\vec{x}')\,|\vec{x}'\rangle \equiv |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle$$

O estado $|\vec{x}'\rangle$ <u>não é autoestado</u> de $\mathcal{T}(d\vec{x}')$. Examinamos o efeito de $\mathcal{T}(d\vec{x}')$ sobre um ket arbitrário

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \mathcal{T}(d\vec{x}')|\alpha\rangle = \mathcal{T}(d\vec{x}')\int d^3x''\, |\vec{x}''\rangle\langle\vec{x}''|\alpha\rangle$$

$$= \int d^3x''\, |\vec{x}'' + d\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}''|\alpha\rangle = \int d^3x''\, |\vec{x}''\rangle\langle\vec{x}'' - d\vec{x}'|\alpha\rangle$$

Em termos da chamada "função de onda" temos

$$\langle \vec{x}' | \alpha \rangle = \psi_\alpha(\vec{x}')$$

$$\mathcal{T}(d\vec{x}')|\alpha\rangle = \int d^3x'' \, |\vec{x}''\rangle \, \psi_\alpha(\vec{x}'' - d\vec{x}')$$

Transladar $|\alpha\rangle$ por $\mathcal{T}(d\vec{x}')$ significa trocar $\psi_\alpha(\vec{x}'')$ por $\psi_\alpha(\vec{x}'' - d\vec{x}')$ (tratamento "ativo").

Propriedades dos operadores de translação:

a) Conservação da probabilidade ou propriedade de unitaridade.

Supondo que o estado original $|\alpha\rangle$ está normalizado, parece razoável pensar que o estado transladado infinitesimalmente também está normalizado

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \mathcal{T}^\dagger(d\vec{x}') \mathcal{T}(d\vec{x}') | \alpha \rangle ,$$

e como o estado $|\alpha\rangle$ é arbitrário, temos:

$$\mathcal{T}^\dagger(d\vec{x}')\mathcal{T}(d\vec{x}') = 1$$

b) Estas operações são comutativas porque:

$$\mathcal{T}(d\vec{x}'')\mathcal{T}(d\vec{x}')\,|\vec{\xi}'\rangle = \mathcal{T}(d\vec{x}'')\left(|\vec{\xi}' + d\vec{x}'\rangle\right)$$

$$= |\vec{\xi}' + d\vec{x}' + d\vec{x}''\rangle = \mathcal{T}(d\vec{x}' + d\vec{x}'')|\vec{\xi}'\rangle =$$

$$= \mathcal{T}(d\vec{x}')\mathcal{T}(d\vec{x}'')|\vec{\xi}'\rangle \,, \quad \text{com}$$

$$\boxed{\mathcal{T}(d\vec{x}')\mathcal{T}(d\vec{x}'') = \mathcal{T}(d\vec{x}'')\mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathcal{T}(d\vec{x}' + d\vec{x}'')}$$

Esta propriedade é chamada Propriedade de grupo comutativo (grupo Abeliano)

c) Identidade: certamente é membro do grupo porque

$$\boxed{1 = \lim_{d\vec{x}' \to 0} \mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathcal{T}(0)}$$

d) Existe a translação inversa $\mathcal{T}^{-1}(d\vec{x}')$. De fato

$$\mathcal{T}(-d\vec{x}')\mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathcal{T}(d\vec{x}' - d\vec{x}') = \mathcal{T}(0) = 1 \,.$$

Logo:

$$\boxed{\mathcal{T}(-d\vec{x}') = \mathcal{T}^{-1}(d\vec{x}')}$$

Todas as propriedades acima são satisfeitas mediante a escolha

$$\boxed{\mathcal{T}(d\vec{x}') = 1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}' \,,}$$

onde $\vec{K} = (K_x, K_y, K_z)$ é um operador hermiteano:

$$\boxed{K_i^\dagger = K_i \,, \quad i = x, y, z}$$

Se entende que para o operador infinitesimal guardamos apenas termos lineares em $d\vec{x}'$!

▶ Ex. Fazer a demonstração como exercício.

Calculemos agora:

$$\vec{x}\left(\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle\right) = \vec{x}\; |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle$$
$$= (\vec{x}' + d\vec{x}')\,|\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle$$

e comutando os operadores:

$$\mathcal{T}(d\vec{x}')\vec{x}\;|\vec{x}'\rangle = \vec{x}'\,\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle$$
$$= \vec{x}'\;|\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle .$$

De maneira que

$$\left[\vec{x}, \mathcal{T}(d\vec{x}')\right]|\vec{x}'\rangle = d\vec{x}'\,|\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle$$
$$\simeq d\vec{x}'\;|\vec{x}'\rangle$$

em 1ª ordem em $d\vec{x}'$. Assim temos a relação de comutação:

$$\left[\vec{x}, \mathcal{T}(d\vec{x}')\right] = d\vec{x}'$$

ou

$$\vec{x}\,\mathcal{T}(d\vec{x}') - \mathcal{T}(d\vec{x}')\vec{x} = \vec{x}\left(1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}'\right) - $$
$$- \left(\cancel{1} - i\vec{K}\cdot d\vec{x}'\right)\vec{x}$$

$$= -i\,\vec{x}(\vec{K}\cdot d\vec{x}') + i(\vec{K}\cdot d\vec{x}')\vec{x} = d\vec{x}'$$

Escolhemos $d\vec{x}'$ na direção $\hat{x}_j$, $d\vec{x}' = dx_j' \cdot \hat{x}_j$, e depois projetamos na direção $\hat{x}_i$

$$-i\,x_i K_j dx_j' + i K_j dx_j' x_i = dx_j' \underbrace{(\hat{x}_j \cdot \hat{x}_i)}_{\delta_{ij}}$$

lembrando que dx_j' é um número:

$$-i\,dx_j'\left(x_i K_j - K_j x_i\right) = dx_j'\,\delta_{ij}$$

Finalmente:

$$\boxed{\left[x_i, K_j\right] = i\,\delta_{ij}\ , \quad i,j = x, y, z}$$

de maneira que para $i = j$, o operador K_i é não compatível com x_i.

§ Momentum linear como gerador das translações

O operador K de antes está ligado às translações infinitesimais. Qual é o significado físico deste operador?

Nos lembramos que em Mecânica Clássica o momentum linear é o gerador infinitesimal das translações. O análogo de uma transformação unitária em MQ é chamado de Transformação Canônica em MC. Uma TC deixa as equações de Hamilton invariantes. A transformação infinitesimal que descreve uma translação é

$$(\vec{x}, \vec{p}) \xrightarrow{TC} (\vec{X}, \vec{P})$$

antigas coordenadas — novas coordenadas

$$\begin{cases} \vec{X} = \vec{x} + d\vec{x} \\ \vec{P} = \vec{p} \end{cases}$$

A função geratriz da referida TC, escolhida como sendo uma função do tipo F_2 (ver Goldstein) se escreve

$$\begin{aligned} F_2(\vec{x}, \vec{P}) &= \vec{x}\cdot\vec{P} + \vec{P}\cdot d\vec{x} \\ &= \vec{x}\cdot\vec{P} + \vec{p}\cdot d\vec{x} \end{aligned}$$

A partir de F_2 podemos obter as equações de

$$\begin{cases} \vec{X} = \dfrac{\partial F_2}{\partial \vec{P}} = \vec{x} + d\vec{x} \\ \vec{p} = \dfrac{\partial F_2}{\partial \vec{x}} = \vec{P} \end{cases}$$

A função geratriz $I = \vec{x} \cdot \vec{P}$ representa a TC idêntica

$$\begin{cases} \vec{X} = \dfrac{\partial I}{\partial \vec{P}} = \vec{x} \\ \vec{p} = \dfrac{\partial I}{\partial \vec{x}} = \vec{P} \quad ; \end{cases}$$

de maneira que podemos escrever F_2 como:

$$F_2(\vec{x}, \vec{P}) = I + \vec{p} \cdot d\vec{x} \,,$$

que devemos comparar com a forma do operador infinitesimal de translação

$$\mathcal{T}(d\vec{x}') = 1 - i\, \vec{K} \cdot d\vec{x}' \,,$$

existindo grande similaridade entre ambos, sugerindo que o operador $\vec{K}$ deva ser relacionado com o momentum linear de alguma maneira.

$[K] \sim (cm)^{-1}$, porque $(\vec{K}\cdot d\vec{x}\,')$ é adimensional.
Associamos então

$$\vec{K} = \frac{\vec{p}}{\text{constante universal (ação)}}$$

$[\vec{p}\cdot\vec{x}\,] \sim (\text{ação}) \sim (\text{energia} \times \text{tempo})$

A constante universal é a mesma que aparece nas relações de de Broglie (1924)

$$p\lambda = h = 2\pi\hbar \,,$$

onde λ é o comprimento de onda associado com a onda que acompanha à partícula:

$$\frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda} = k \longrightarrow \vec{K}\,.$$

Com esta identificação, o operador $\vec{K}$ corresponde com k, o número de onda. Assim o operador de translação infinitesimal se escreve

$$\mathcal{T}(d\vec{x}\,') = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\vec{p}\cdot d\vec{x}\,' \,,$$

e as relações de comutação entre $\vec{x}$ e $\vec{p}$ ficam

$$[x_i, p_j] = \hbar [x_i, K_j] = i\hbar \delta_{ij}$$
$$i,j = 1,2,3$$

$$\boxed{[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}}$$

Estas relações de comutação implicam que (x, p_x) são operadores <u>não compatíveis</u>. Não existem, portanto, autoestados simultâneos de (x, p_x). Usando o Teorema sobre o Princípio de Incerteza, obtemos:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

► (Exercício)

► <u>Translações finitas</u>

Queremos construir agora o operador correspondente à uma translação finita, digamos na direção x:

$$\vec{\Delta x}' = \Delta x' \hat{x}$$

$$\mathcal{T}(\vec{\Delta x}') |\vec{x}'\rangle = |\vec{x}' + \Delta x' \hat{x}\rangle$$

Uma translação finita pode ser pensada como uma seqüência de translações infinitesimais. Definimos:

$$\delta x' \equiv \frac{\Delta x'}{N} \; ,$$

tomando eventualmente o limite $N \to \infty$

$$\left(1 - i\frac{p_x}{\hbar}\delta x'\right)\left(1 - i\frac{p_x}{\hbar}\delta x'\right)\cdots\left(1 - i\frac{p_x}{\hbar}\delta x'\right) =$$

$$= \left(1 - i\frac{p_x}{\hbar}\frac{\Delta x'}{N}\right)^N ,$$

e

$$\mathcal{T}(\Delta\vec{x}') = \lim_{N\to\infty}\left(1 - i\frac{p_x}{\hbar}\frac{\Delta x'}{N}\right)^N$$

Este limite define a exponencial de um operador

$$\lim_{N\to\infty}\left[1 - i\frac{p_x}{h}\left(\frac{\Delta x'}{N}\right)\right]^N \equiv \exp\left(-i\frac{p_x\cdot\Delta x'}{\hbar}\right)$$

Este último operador é definido, na verdade, pela sua série

$$\exp(A) = 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \cdots + \frac{A^n}{n!} + \cdots$$

Uma propriedade geométrica fundamental das translações é que elas comutam. Consideremos duas translações arbitrárias $\mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,')$ e $\mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,'')$:

$$\mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,')\left(\mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,'')\,|\vec{x}\,'\rangle\right) = \mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,')\,|\vec{x}\,'+\Delta\vec{x}\,''\rangle$$

$$= |\vec{x}\,'+\Delta\vec{x}\,''+\Delta\vec{x}\,'\rangle = \mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,'')\,\mathcal{T}(\Delta\vec{x}\,')\,|\vec{x}\,'\rangle,$$

porque a soma de vetores é uma operação comutativa. Consideremos agora duas translações infinitesimais ao longo dos eixos $\underline{x}$ e $\underline{y}$:

$$\left[\mathcal{T}(\Delta x'\hat{x})\ ,\ \mathcal{T}(\Delta y'\hat{y})\right] = 0$$

$$= \left(1-\frac{ip_x}{\hbar}\Delta x'\right)\left(1-\frac{ip_y}{\hbar}\Delta y'\right)-\left(1-\frac{ip_y}{\hbar}\Delta y'\right)\left(1-\frac{ip_x}{\hbar}\Delta x'\right)$$

$$= 1-\frac{ip_y}{\hbar}\Delta y'-\frac{ip_x}{\hbar}\Delta x'-\frac{p_xp_y}{\hbar^2}\Delta x'\Delta y'$$

$$-\left(1-\frac{ip_y}{\hbar}\Delta y'-\frac{ip_x}{\hbar}\Delta x'-\frac{p_yp_x}{\hbar^2}\Delta x'\Delta y'\right)$$

$$= -\frac{\Delta x'\Delta y'}{\hbar^2}\left(p_xp_y-p_yp_x\right) = -\frac{\Delta x'\Delta y'}{\hbar^2}\left[p_x,p_y\right]=0,$$

e como $\Delta x'$ e $\Delta y'$ são arbitrários, obtemos

$$[\,p_x,p_y\,]=0$$

Isto pode ser generalizado para todas as componentes

$$[p_i, p_j] = 0, \quad i,j = x,y,z.$$

Portanto, todas as componentes do momentum linear são observáveis compatíveis. Escrevemos os autoestados como:

$$|\vec{p}\,'\rangle = |p_x', p_y', p_z'\rangle,$$

com

$$p_x|\vec{p}\,'\rangle = p_x'|\vec{p}\,'\rangle, \quad p_y|\vec{p}\,'\rangle = p_y'|\vec{p}\,'\rangle$$

$$p_z|\vec{p}\,'\rangle = p_z'|\vec{p}\,'\rangle$$

Operemos com um operador de uma translação infinitesimal sobre $|\vec{p}\,'\rangle$:

$$\mathcal{T}(d\vec{x}\,')|\vec{p}\,'\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot d\vec{x}\,'\right)|\vec{p}\,'\rangle$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\cdot d\vec{x}\,'\right)|\vec{p}\,'\rangle,$$

o ket $|\vec{p}\,'\rangle$ permanece inalterado (análogo da transformação canônica). $|\vec{p}\,'\rangle$ resulta ser autoestado de $\mathcal{T}(d\vec{x}\,')$, ou equivalentemente

$$[\vec{p}, \mathcal{T}(d\vec{x}\,')] = 0$$

Porém, o operador $\mathcal{T}(d\vec{x}')$ não é hermiteano e possui autovalores complexos.

Resumo das relações de comutação:

$$\boxed{[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad i,j = x,y,z} \quad (*)$$

"Relações Canônicas de Comutação" (Heisenberg, 1925)

Uma possibilidade de formulação alternativa é postular as relações (*) e construir a partir dali os operadores de translação.

A álgebra dos comutadores é similar à algebra dos colchetes de Poisson da Mecânica Clássica:

$$[A(p,q), B(p,q)]_{\text{Clássico}} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

onde A e B são grandezas clássicas que se correspondem com os operadores A e B da Mecânica Quântica.

Dirac (1925) notou que as relações da MQ podiam ser obtidas das correspondentes clássicas com a identificação

$$[\ ,\ ]_{\text{Clássico}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ]$$

Em particular, as relações canônicas são

$$[x_i, x_j]_{\text{Clássico}} = [p_i, p_j]_{\text{Clássico}} = 0 \,,$$

$$[x_i, p_j]_{\text{Clássico}} = \delta_{ij}$$

$i, j = x, y, z$

Propriedades (Comutadores e colchetes de Poisson):

i) $[A, A] = 0$

ii) $[A, B] = -[B, A]$

iii) $[A, c] = 0 \,, \quad c \in \mathbb{C}$

iv) $[A+B, C] = [A, C] + [B, C]$

v) $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

vi) $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$

(Identidade de Jacobi)